дует, что при $\mathscr{E} > 0$ энергия не квантуется — энергетический спектр *непрерывен*. Волновая функция не стремится к нулю при $x \to \pm\infty$, т. е. движение частицы *инфинитно*, как того и требует общая теория.

§ 25. Квантование в случае сферически симметричного силового поля

1. В атомной физике более важен случай, когда потенциальная функция U не одномерна, а *сферически симметрична* относительно некоторого силового центра. Примером может служить положительно заряженное атомное ядро, в электрическом поле которого движется электрон. Силовой центр (например, атомное ядро) мы сначала будем считать *бесконечно тяжелым* и *неподвижным*. Начало координат поместим в силовом центре. Обозначим через $\boldsymbol{r}$ радиус-вектор, проведенный из начала координат к рассматриваемой частице. Тогда в случае сферической симметрии $U = U(r)$, где $r \equiv |\boldsymbol{r}|$. В этом случае волновая функция ψ, т. е. решение уравнения Шредингера (21.7), может зависеть не только от r, но и от угловых переменных, определяющих направление радиус-вектора $\boldsymbol{r}$. Однако мы ограничимся здесь только *сферически симметричными решениями*, т. е. решениями, зависящими только от $|\boldsymbol{r}|$; $\psi = \psi(r)$. Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний (21.7) запишется в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}\right) + [\mathscr{E} - U(r)]\,\psi = 0. \tag{25.1}$$

Это уравнение отличается от исследованного выше одномерного уравнения (22.1) наличием дополнительного члена $\frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}$. Однако подстановкой

$$\psi = \chi/r \tag{25.2}$$

оно приводится к виду

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + [\mathscr{E} - U(r)]\,\chi = 0. \tag{25.3}$$

Это уравнение математически тождественно с уравнением (22.1) для одномерного случая. Поэтому все результаты, полученные в § 22, сохраняют силу для вспомогательной функции $\chi(r)$. Единственное отличие состоит в том, что при $r = 0$ функция χ должна быть не только конечной, но и обращаться в нуль, так как в противном случае функция $\psi = \chi/r$ обращалась бы в бесконечность при $r = 0$. Поэтому половина решений, полученных в § 22, должна быть исключена. Надо оставить только решения, изображающиеся кривыми, проходящими через начало координат (рис. 47). При $\mathscr{E} < 0$ эти решения для положительных r представлены сплошными кривыми, а их продолжения

в область отрицательных r — пунктирными кривыми. Разумеется, в нашей задаче отрицательные r не имеют физического смысла и введены формально математически, чтобы получилась аналогия с одномерным случаем. Поэтому остается справедливой доказанная в § 22 теорема, что число узлов функции $\psi(r)$ (r существенно положительно) на единицу меньше номера соответствующего собственного значения. При этом точка $r=0$ за узел не считается. Рис. 47 иллюстрирует это утверждение.

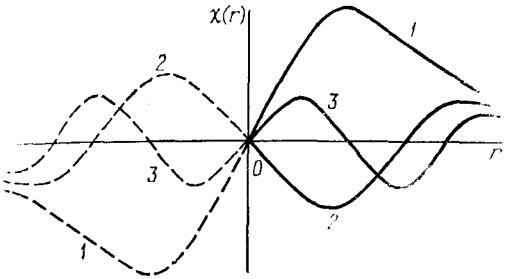

Рис. 47

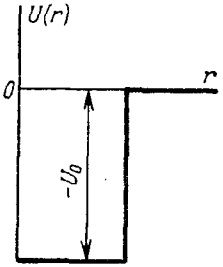

Рис. 48

2. Частным случаем сферически симметричного силового поля является *трехмерная сферически симметричная потенциальная яма*, сечение которой плоскостью, проходящей через силовой центр, имеет прямоугольную форму (рис. 48). Так называется трехмерная потенциальная функция U, зависящая только от расстояния r до силового центра, которая определяется выражениями

$$U(r)=\begin{cases} -U_0 & \text{при } r<a, \\ 0 & \text{при } r>a. \end{cases} \tag{25.4}$$

Из изложенного выше следует, что в этом случае сферически симметричные волновые функции $\psi(r)$ и значения $\mathscr{E}$ в стационарных состояниях находятся так же, как и в случае одномерной прямоугольной потенциальной ямы (см. § 24). Различие состоит только в том, что теперь четные решения уравнения (25.3) (если решения формально продолжить в сторону отрицательных r) должны быть исключены. Иными словами, при $\mathscr{E}<0$ остаются только решения

$$\begin{aligned} \psi &= B\sin kr \quad \text{при } 0<r<+a, \\ \psi &= Ce^{-\alpha r} \quad \text{при } r>+a, \end{aligned} \tag{25.5}$$

где k и α определяются прежними формулами (24.6). В соответствии с этим из двух формул (24.10а) и (24.11а) надо сохранить только вторую, т. е.

$$\eta=-\xi\operatorname{ctg}\xi, \tag{25.6}$$

причем ξ и η определяются прежними выражениями (24.12).

В случае одномерной симметричной ямы *всегда существует по крайней мере одно собственное значение* дискретного спектра энергии с четной волновой функцией. В случае сферически симметричной прямоугольной ямы этого может и не быть. Действительно, кривая $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ первый раз пересекает горизонтальную ось координат в точке $\xi = \pi/2$, $\eta = 0$ (рис. 46, *б*). Из формулы (24.13) видно, что если

$$(\pi/2)^2 > -2mU_0a^2/\hbar^2,$$

т. е.

$$-U_0 < \pi^2\hbar^2/(8ma^2), \tag{25.7}$$

то эта кривая нигде не пересечется с окружностью (24.13). Это значит, что при условии (25.7) в потенциальной яме не появится *ни одного уровня дискретного спектра энергии*. Первый уровень появляется, когда крайняя левая кривая $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ на рис. 46, *б* начинает пересекаться с соответствующей окружностью. Это происходит в точке $\xi = \pi/2$, $\eta = 0$. Из второго уравнения (24.6) следует, что в этом случае $\mathscr{E} = 0$, т. е. при возрастании глубины ямы первый уровень появляется на границе дискретного и непрерывного спектров. Расстояние этого уровня от дна потенциальной ямы равно $-U_0 = \hbar^2\pi^2/(8ma^2)$, как это легко получить из первой формулы (24.6). В рассматриваемом случае весь дискретный спектр состоит из одного только уровня нулевой энергии.

§ 26. Система двух взаимодействующих частиц

1. До сих пор мы рассматривали движение *одной* частицы в заданном силовом поле. Более реальным является случай *двух* частиц, взаимодействующих между собой. В классической механике в этом случае движение распадается на движение системы как целого в отсутствие внешних сил (*движение центра масс*) и на движение *одной частицы относительно другой* под действием сил взаимодействия между ними (*относительное движение*). Последнее формально сводится к движению одной частицы с заменой ее истинной массы на *приведенную массу*

$$m = m_1m_2/(m_1 + m_2), \tag{26.1}$$

где m_1 и m_2 — массы первой и второй частиц. Совершенно так же обстоит дело и в квантовой механике при рассмотрении стационарных состояний.

Исходным служит уравнение Шредингера для стационарных состояний двух частиц. Оно является естественным обобщением уравнения (21.7) и имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + U(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)\right]\psi = \mathscr{E}\psi. \tag{26.2}$$